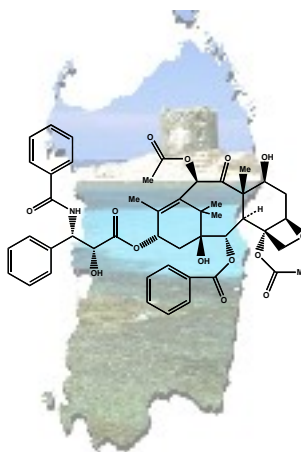




SardiniaChem2008

GIORNATA DI STUDIO DEDICATA
ALLA CHIMICA ORGANICA
DELLE MOLECOLE BIOLOGICAMENTE ATTIVE

30 Maggio 2008, Aula Magna della Facoltà di Scienze – Sassari



Comitato Scientifico:

Giampaolo Giacomelli, *Univ. Sassari*; Giovanna Delogu *CNR Sassari*; Salvatore Cabiddu, *Univ. Cagliari*; PierPaolo Piras, *Univ. Cagliari*

Comitato Organizzatore:

Andrea Porcheddu, *Univ. Sassari*; Roberto Dallochio, *CNR Sassari*;
Stefania De Montis *Univ. Cagliari*

Sponsor

hanno contribuito alla realizzazione del convegno:

[UNIVERSITA' di Sassari-Dipartimento di Chimica](#); [UNIVERSITA' di Sassari-Facoltà di Scienze MFN](#); [CNR-Istituto di Chimica Biomolecolare, Sassari](#); [UNIVERSITA' di Cagliari](#);
[SAPIO s.r.l.](#); [SIGMA-ALDRICH s.r.l.](#); [CARLO ERBA Reagenti](#);
[MEDINLAB s.r.l.](#); [VWR International s.r.l.](#)

METABOLOMICA NMR PER LA DIAGNOSTICA UMANA E LA TRACCIABILITÀ DEI PRODOTTI AGRO-ALIMENTARI

[N. Culeddu¹](#), [L. R. Cagliani²](#), [R. Consonni²](#), [M. Chessa³](#)

¹ Lab. NMR, ICB, CNR, v. La Crucca 3, 07040 Sassari

² Lab. NMR, ISMAC, CNR, v. Bassini 15, 20133 Milano

³ Sardinian Mediterranean Imaging Research Group, v.le Caprera 3/A 07100 Sassari

INTRODUZIONE

La Metabolomica descrive il profilo chimico di un sistema biologico in termini dei suoi metaboliti a basso peso molecolare presenti in cellule, tessuti, organi e fluidi biologici. Le sue componenti (i metaboliti) possono essere visti come il prodotto finale dell'espressione genica o dell'attività proteica (enzimi), che definiscono così il fenotipo biochimico di un sistema biologico nel suo insieme, compreso l'uomo.

METABOLOMICA NMR PER LA DIAGNOSTICA

La spettroscopia NMR dei biofluidi è un tool innovativo per la diagnosi di malattie dismetaboliche e degenerative. Benchè lo spettro NMR di un biofluido sia estremamente complesso, l'utilizzo delle tecniche chemio metriche, unite a metodologie di "pattern recognition" ci permette di evidenziare le differenze tra spettri provenienti da soggetti sani rispetto a quelli provenienti da soggetti patologici

Attraverso tecniche Metabolomiche ed un semplice trattamento statistico si riesce a discriminare tra spettri NMR di Bambini diabetici e sani, identificandone in via preliminare componenti che permettono tale discriminazione. Il modello ottenuto permette inoltre una reale predizione (diabetico/sano) dello stato di campioni di urine. Questi risultati indicano come le tecniche di Metabolomica possano essere una nuova via nella diagnosi non invasiva.

Il trattamento PCA (Principal Components Analysis) benchè dia un risultato pregevole (si passa da 140 componenti a sole 5 funzioni discriminanti) non produce tali funzioni discriminanti utilizzabili in quanto non riduce apprezzabilmente l'insieme delle componenti importanti. Il trattamento LDA (Linear Discriminant Analysis) al contrario fornisce un modello di separazione che da conto della separazione dei campioni maggiore del 90%.

E inoltre possibile attraverso la “pattern recognition” riconoscere con alto grado di precisione sia i componenti attivi nel modello di separazione che assegnare la presenza di 90 componenti nelle urine.

TRACCIABILITÀ DEI PRODOTTI AGRO-ALIMENTARI

Già da diversi anni nel nostro laboratorio vengono utilizzate tecniche di risonanza magnetica nucleare (NMR) per la caratterizzazione di matrici alimentari. In questa parte del lavoro vengono presentati studi NMR di ^1H su campioni di zafferano di diverse origini geografiche. Sono stati inizialmente analizzati campioni di zafferano provenienti da diverse zone geografiche. Lo score plot della PCA in evidenza come la differenza tra un campione DOP italiano e quelli stranieri, risulta basata sostanzialmente sul contenuto di picrocrocina e safranale, praticamente assenti nei campioni stranieri. Sono stati quindi analizzati solo i campioni di provenienza italiana, sia per evidenziare differenze metaboliche tra i campioni DOP e quelli commerciali ma anche per osservare eventuali differenziazioni metaboliche dovute alla diversa origine geografica.

L'integrazione di tecniche “omiche” differenti è attualmente una frontiera della ricerca nel campo. L'utilizzo di sofisticati sistemi matematici di correlazione dei dati (cross-correlation, combined covariance spectroscopy), attraverso la costruzione di spazi numerici multidimensionali, permette di estrarre nuove informazioni nascoste dalla complessità e molteplicità dei segnali ottenuti dalle singole tecniche.